Ciencia e Ingeniería
Revista Interdisciplinar de Estudios en Ciencias Básicas e Ingenierías.
Año 2014, Enero-Junio, Vol. (1) N° (1) ISSN 2389-9484.
Universidad de La Guajira, Facultades de Ciencias Básicas y Aplicadas e Ingeniería.
La Guajira-Colombia.
Revista en Línea http://revistas.uniguajira.edu.co/index.php/cei

FUNDAMENTOS DE SIMULACIÓN MEDIANTE ALGORITMO EN DIFERENCIAS FINITAS DE LA EVOLUCIÓN ESPACIAL Y TEMPORAL EN LA CONDUCCIÓN DEL CALOR

FOUNDATIONS OF SIMULATION BY MEANS OF ALGORITHM IN FINITE DIFFERENCES OF THE SPACE AND TEMPORARY EVOLUTION IN THE CONDUCTION OF THE HEAT

Lyon Euclides y Luis Rosales

Departamento de Ingeniería Eelectrónica
UNEXPO-Vicerrectorado de Puerto Ordaz
luis.rosales2@gmail.com.

Recibido: marzo 17 de 2014 Aceptado: julio 30 de 2014

RESUMEN

Se planteó la necesidad de estudiar los conceptos fundamentales de la simulación mediante el desarrollo de un algoritmo basado en diferencias finitas, para simular la evolución espacial y temporal, de un fenómeno físico particular (conducción del calor) modelado con ecuación diferencial parcial parabólica. Este artículo es el primero de una serie de dos, en el cual se verifica la validez del algoritmo diseñado para 1D, mediante la utilización de resultados obtenidos en un artículo base como patrón de comparación; en el segundo artículo se presentará el estudio del problema en 2D tomando como base en algoritmo y la metodología planteada aquí.

Palabras Clave: Simulación, algoritmo, diferencias finitas, evolución espacial y temporal.

ABSTRACT

The necessity considered to study the fundamental concepts of the simulation by means of the development of an algorithm based on finite differences, to simulate the space and temporary evolution, of particular a physical phenomenon (conduction of the heat) modeled with equation parabolic partial differential. This article is first of a series of two, in which the validity of the algorithm designed for 1D is verified, by means of the use of results obtained in an article it bases like comparison pattern; in the second article the study of the problem in 2D will appear taking as it bases on algorithm and the methodology raised here.

Keywords: Simulation, algorithm, finite differences, space and temporary evolution.

1. INTRODUCCIÓN

Se planteó la necesidad de desarrollar un algoritmo basado en diferencias finitas, para simular la evolución espacial y temporal, de un fenómeno físico particular (conducción del calor) modelado con ecuación diferencial parcial parabólica, que permita estudiar los conceptos fundamentales de la simulación. Este artículo es el primero de una serie de dos, en el cual se verifica la validez del algoritmo diseñado para 1D, mediante la utilización de resultados obtenidos en (Millán et al., 2011) como patrón de comparación; en el segundo artículo se presentará el estudio del problema en 2D.

I. ANTECEDENTES DEL TEMA.

Se toma como base el artículo (Millán *et al.*, 2011) en el cual se estudia el problema de la difusión de calor en 1D, se analizan los problemas asociados a un método explícito para la solución numérica en diferencias finitas de la ecuación diferencial parcial parabólica. Se obtienen resultados que corroboran el límite de estabilidad teórico y se verifica la convergencia mediante la comparación con resultados proveniente de la solución analítica, se manipulan la ventana de tiempo de simulación, el paso espacial y temporal. No se da ningún detalle del software utilizado refiriéndose a el sólo como “científico”.

El trabajo de investigación presente se relaciona con el antecedente (Millán *et al.*, 2011) en que desarrollamos un algoritmo para simular el mismo fenómeno y lo validaremos con los resultados del antecedente, los resultados obtenidos y el análisis de los fundamentos de la simulación presentados en el presente trabajo, sirven de base para un segundo artículo en donde se abordará el problema en 2D.

II. OBJETIVO DEL TRABAJO.

El objetivo de este trabajo es estudiar los conceptos fundamentales de la simulación numérica, mediante algoritmo basado en método explícito de diferencias finitas, que desarrolle la evolución espacial y temporal del fenómeno de la conducción del calor modelado con ecuación diferencial parcial parabólica.

III. FUNDAMENTO DE ESTUDIO.

El objeto de estudio del presente trabajo es el fundamento de la simulación numérica, específicamente el refinamiento de mallas, condiciones iniciales y de bordes, convergencia y estabilidad del algoritmo de solución de la ecuación diferencial parcial aproximada mediante diferencias finitas y método explícito. Se utiliza como fenómeno físico a estudiar la conducción de calor en un material homogéneo e isótropo con una fuente de calor exógena al material que proporciona el patrón de calentamiento inicial. Tabla 1

TABLA I

PROPIEDADES DEL MATERIAL OBJETO DE ESTUDIO

Densidad	Conductividad térmica	Calor específico	Difusión térmica
ρ	k	c	α
7.8 g/cm³	0.13 cal/s.cm.°C	0.11 cal/g.°C	0.15 cm²/s

IV.METODOLOGÍA.

Se ejecutaron nueve pasos orientados por los siguientes objetivos específicos:

1. Estudiar el fenómeno físico a simular y el material utilizado en (Millán *et al.*, 2011).
2. Plantear la ecuación en diferencias finitas para el método explícito y el patrón inicial de temperatura incluyendo los bordes (Millán *et al.*, 2011).
3. Establecer el núcleo del algoritmo iterativo a desarrollar en este trabajo.
4. Establecer el límite teórico de estabilidad CFL según las características del fenómeno y del material estudiado.
5. Diseñar el algoritmo e implementación en Matlab™.
6. Validar el algoritmo utilizando como patrón datos reportados en (Millán *et al.*, 2011).
7. Afinar la ventana temporal de simulación (T)
8. Afinar Δx.
9. Afinar Δt.

V.DESARROLLO

MÉTODOS Y MATERIALES.

El trabajo se desarrolló en nueve pasos, cada uno orientado por un objetivo específico:

1. Estudiar el fenómeno físico a simular y el material utilizado
   La conducción del calor en una dimensión espacial en un material homogéneo e isótropo, que no intercambia calor con el ambiente se modela matemáticamente mediante la siguiente ecuación diferencial parcial (Romero *et al.*, 2001):

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \quad \alpha = \frac{k}{\rho c} \qquad (1)$$

   Donde α depende del material y es denominado coeficiente de difusión del calor, k es el coeficiente de conductividad térmica, ρ es la densidad y c el calor específico (pp. 95-98).
   Se tomó como material para el estudio el acero descrito en (Millán *et al.*, 2011).

2. Plantear la ecuación en diferencias finitas para el método explícito y el patrón inicial de temperatura incluyendo los bordes (Millán *et al.*, 2011)

Se aproximó la derivada temporal con una diferencia progresiva dada por la ecuación (Romero et al., 2001).

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{u(x, t + \Delta t) - u(x, t)}{\Delta t} \qquad (2)$$

Para la aproximación de la derivada espacial se utilizó la diferencia de punto central, para en método explicito está dada por (3).

$$\alpha \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \alpha \frac{u(x + \Delta x, t) - 2u(x, t) + u(x - \Delta x, t)}{\Delta x^2} \qquad (3)$$

El patrón inicial de temperatura incluyendo los bordes, está dado por las ecuaciones (4) y (5)

$$u(X,0) = \begin{cases} 10X & 0 \le X \le 10 \quad (4) \\ 200\text{-}10X & 10 \le X \le 20 \quad (5) \end{cases}$$

3. Establecer el núcleo del algoritmo iterativo.

El núcleo del algoritmo iterativo se obtiene vinculando *t* con j y *x* con i.

Para el método explicito se igualan (2) = (3) y se reescriben utilizando notación matricial dando como resultado la ecuación (6).

$$u(j+1,i) = \lambda u(j,i+1) + (1-2\lambda)u(j,i) + \lambda u(j,i-1), \qquad \lambda = \alpha \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \qquad (6)$$

4. Establecer el límite teórico de estabilidad CFL según las características del fenómeno y del material estudiado.

   Si observamos la ecuación (6), el coeficiente $\lambda = \alpha(\Delta t/\Delta x^2)$ es determinante en el avance del algoritmo hacia el estado estable. En (Ezquerro,2013)se establece que para garantizar la estabilidad el coeficiente debe cumplir con $0 \le \lambda \le 0.5$, lo cual implica que el límite de estabilidad se da cuando $\Delta t/\Delta x^2 = 1/(2\alpha)$ (p. 98).

   La simulación se iniciará con un paso $\Delta x = 2$ y $\Delta t = 0.5$ lo cual implica un $\lambda = 0.018$ esto predice un comportamiento sin que aparezca el fenómeno de la inestabilidad.

5. Diseñar el algoritmo e implementación en Matlab™.

   El núcleo del algoritmo iterativo es la ecuación (6), y será implementado en el lenguaje de programación de Matlab™. MATLAB Version 7.4.0.287 (R2007a)
   Operating System: Microsoft Windows XP Version 5.1 (Build 2600: Service Pack 3)

6. Validar el algoritmo.
   Se realizó la validación mediante el contraste con los resultados obtenidos en (Millán *et al.*, 2011) con la ventana temporal T=120 para $\Delta x = 2$ y $\Delta t = 0.5$.

7. Afinar la ventana temporal de simulación (T).
   Estudiar el comportamiento del algoritmo al afinar la ventana temporal de simulación (T) dejando fijos Δt y Δt, midiendo el acumulado L1.

8. Afinar Δx.
   Estudiar el comportamiento del algoritmo al afinar Δx dejando fijos Δt y T.

9. Afinar Δt.
   Estudiar el comportamiento de la evolución temporal al afinar Δt dejando fijos Δx y T.

VI.PRESENTACIÓN Y DISCUSIÓN DE RESULTADOS.

1. Algoritmo implementado en Matlab™.

```
% Define dominio e inicializa la Grilla
 L = 20;      %Extensión del dominio en x (cm)
 T = 125;     % Extensión del tiempo en (s)
 Dx = 2 ;      % Discretización en x
 x = 0:Dx:L;  % Coordenada x
 Dt = 14;    % Discretización en t
 t = 0:Dt:T;  % Coordenada t
 % Grilla

Nx = round((L/Dx)); % Número de nodos en x
 Nt = round((T/Dt)); % Número de nodos en t
 i = 1;       % Iteración en la componente espacial x
 j = 1;       % Iteración en el tiempo
 u(1,1)=0;    % Inicializa la Grilla
 for j = 1:Nt+1
  for i = 1:Nx+2
   u(j,i)=0; % Limpia la Grilla
  end
 end

%Patrón inicial de temperaturas
 ui(1,1)=0;
 for i=1:Nx+2
  if (i-1)*Dx <= 10
   ui(1,i)=10*(i-1)*Dx;
  end
  if (i-1)*Dx > 10
   ui(1,i)=200-10*(i-1)*Dx;
  end
 end
 u(1,:)=ui;

%Gráfica Condiciones iniciales
 uig(1,1)=0;
 for i=1:Nx+1
  uig(1,i)= ui(1,i);
 end
```

```
plot(x,uig(1,:),'r')

% Característica del material
c=0.11;      % Capacidad térmica cal/(g.°C)
p=7.8;       %Densidad g/(cm3)
k=0.13;      % Conductividad térmica cal/(s.cm.°C)
a=k/(c*p);   % cm2/s
Y=a*Dt/(Dx*Dx);% Factor de convergencia y estabilidad

% Simulación de patrón de temperaturas
for j = 1:Nt
 for i = 2:Nx
  u(j+1,i)=Y*(u(j,i+1)+u(j,i-1))+(1-2*Y)*u(j,i);
 end
end

%Temperaturas a graficar
ug(1,1)=0;
for j = 1:Nt+1
 for i = 1:Nx+1
  ug(j,i)=u(j,i) ; % Grilla con puntos a graficar
 end
end

%Gráfica de la distribución en estado estable
hold on
plot(x,ug(Nt,:),'g')

%Gráfica de la evolución temporal
t = 1:12:120;
for i = 1:Nx
  plot(t,ug(:,i),'r'); % Grilla con puntos a graficar
  hold on
end
```

2. Validación del algoritmo.

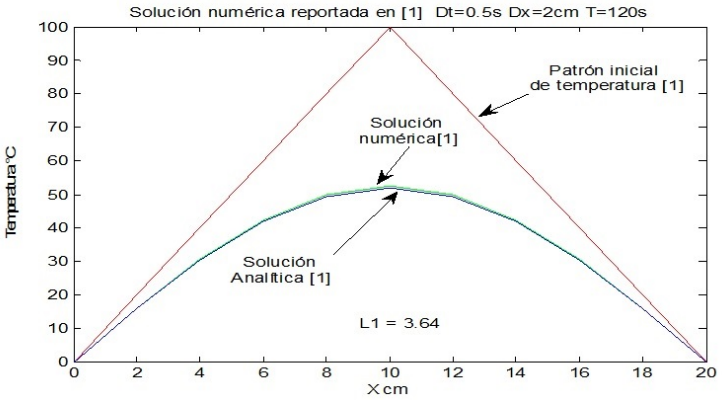
Se realizó la validación mediante el contraste entre los resultados de la solución numérica obtenida en este artículo y los resultados obtenidos en (Millán *et al.*, 2011) con la ventana temporal T=120 para $\Delta x = 2$ y $\Delta t = 0.5$.

A continuación se presentan las gráficas de: las condiciones iniciales, la solución numérica y la solución analítica reportadas en (Millán *et al.*, 2011)

En la GRÁFICA 1 puede observarse que para las condiciones impuestas de Δt=0.5 s, Δx=2 cm y T=120 s, la precisión de la solución numérica reportada en (Millán *et al.*, 2011) presenta un error absoluto acumulado de L1=3.64 respecto a la solución analítica reportada en el mismo artículo.

A continuación se presentan las gráficas de: las condiciones iniciales, la solución numérica reportada en este artículo y la solución analítica reportada.

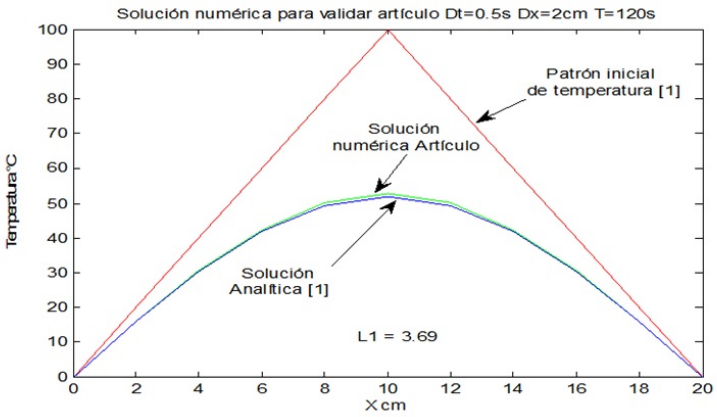
GRÁFICA 1: SOLUCIÓN NUMÉRICA REPORTADA EN [1]



En la GRÁFICA 2 puede observarse que para las condiciones impuestas de Δt=0.5 s, Δx=2 cm y T=120 s, la precisión del algoritmo reportado en este artículo presenta un error absoluto acumulado de L1=3.69 respecto a la solución analítica reportada en (Millán *et al.*, 2011).

Comparando los errores acumulados se observa una diferencia de 1.37 %, entre los resultados reportados en (Millán *et al.*, 2011) y los reportados en el presente artículo, tomando los primeros como patrón de referencia. No obstante de no conocer los criterios de redondeo al presentar los valores en (Millán *et al.*, 2011) podemos afirmar que la diferencia entre los valores de L1 es aceptable.

GRÁFICA 2: SOLUCIÓN NUMÉRICA REPORTADA EN ESTE ARTÍCULO



3. Afinación de la ventana temporal de simulación (T).

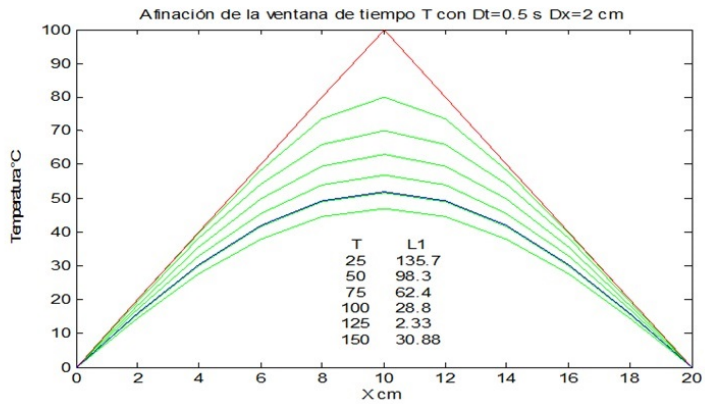
Se estudió el comportamiento del algoritmo al afinar la ventana temporal de simulación (T) dejando fijos Δt y Δt, midiendo el acumulado L1.

A continuación se muestran las gráficas con los resultados de afinación de la ventana temporal de simulación T para seis valores 25, 50, 75, 100, 125 y 150, se midió L1 para cada caso.

En la GRÁFICA 3 se presentan los resultados de la solución numérica para seis valores de la ventana temporal de simulación T, analizando los valores de T y L1 podemos afirmar que el óptimo se encuentra entre las ventanas T=100 y T=150 muy cercano a 125, la

solución numérica para este valor en la gráfica casi se solapa con la solución analítica. No se presentó el fenómeno de la inestabilidad.

GRÁFICA 3: AFINACIÓN DE LA VENTANA TEMPORAL DE SIMULACRO (T)



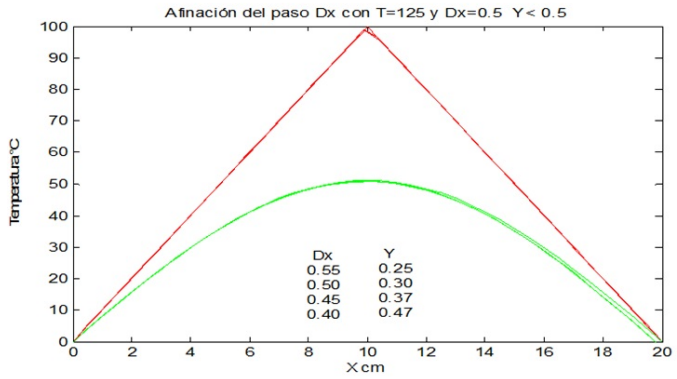
4. Afinación del paso Δx.

Se estudió el comportamiento del algoritmo al afinar del paso Δx dejando fijos Δt=0.5 y T=125.

La prueba se diseñó tomando en cuenta la condición de estabilidad enunciada en (Ezquerro, 2012) $0 \leq \lambda \leq 0.5$ (p. 98). En la GRÁFICA 4 se muestran los resultados de afinación del paso en *x* para cinco valores Δ*x* [0.55, 0.50, 0.45, 0.40] menores que 1 y aproximarnos al límite de estabilidad λ=0.5, λ [0.25, 0.30, 0.37, 0.47] para observar su influencia en la convergencia y en la estabilidad.

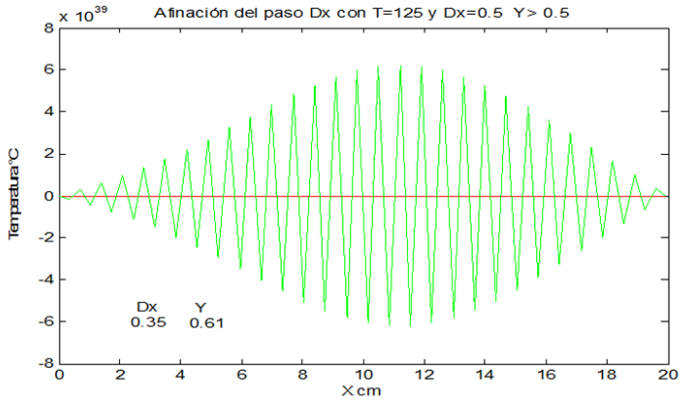
En la GRÁFICA 4 se observa que las soluciones numéricas para los cinco valores Δx < 1 se solapan, lo cual indica que la influencia sobre el error es despreciable, esto es debido a que en este algoritmo el error por truncamiento depende de $(\Delta x)^2$, no aparece el fenómeno de la inestabilidad pues no hemos sobrepasado el límite λ=0.5

GRÁFICA 4: PASO Δx PARA COMPORTAMIENTO ESTABLE λ<0.5



En la GRÁFICA 5 se observa que la solución numérica para los valor Δx =0.35 y λ= 0.65, entra en inestabilidad tal y como lo plantea lo enunciado en (Ezquerro, 2013) para la condición de estabilidad $0 \leq \lambda \leq 0.5$ (p. 98)

GRÁFICA 5: PASO Δx PARA COMPORTAMIENTO INESTABLE λ<0.5



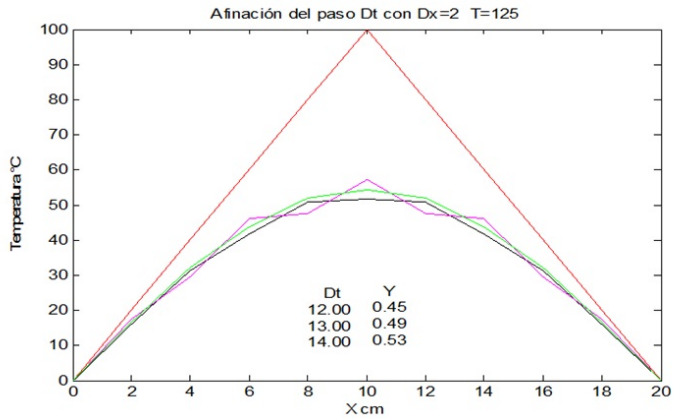
5. Afinación del paso Δt.

Se estudió el comportamiento del algoritmo al afinar del paso Δt dejando fijos Δx=2 y T=125.

La prueba se diseñó tomando en cuenta la condición de estabilidad enunciada en (Ezquerro, 2012) $0 \leq \lambda \leq 0.5$ (p. 98). En la GRÁFICA 6 se muestran los resultados de afinación del paso en *t* para tres valores Δ*t* [12, 13, 14] y aproximarnos al límite de estabilidad λ=0.5, λ [0.45, 0.49, 0.53] para observar su influencia en la estabilidad.

En la GRÁFICA 6 se observa que la solución numérica para los valores Δt = 13 y λ= 0.49 comienza a entrar en inestabilidad y para Δt = 14 y λ= 0.53, ya el fenómeno de estabilidad es notable como lo plantea lo enunciado en (Ezquerro,2012) para la condición de estabilidad $0 \leq \lambda \leq 0.5$ (p. 98). Se puede notar que el algoritmo es menos sensible al acercarnos al límite de estabilidad cuando variamos Δt, comparado con el caso de la afinación de Δx.

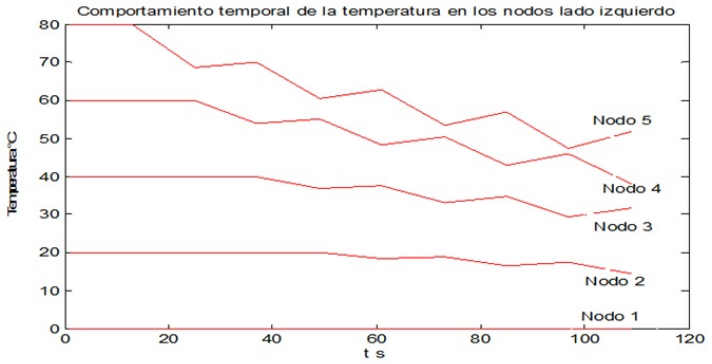
GRÁFICA 6: PASO Δt ALREDEDOR DEL LÍMITE DE ESTABILIDAD λ=0.5



En la GRÁFICA 7 se observa el comportamiento temporal para los nodos en x y se observa como ser propaga la inestabilidad en el tiempo, este es un fenómeno que no es característico del sistema en estudio. Se da bajo simulación cuando la razón de muestreo

$\Delta t/(\Delta x)^2$ no es apropiada respecto al coeficiente de difusión térmica α, lo que termina violando la condición de estabilidad del algoritmo $0 \leq \lambda \leq 0.5$.

GRÁFICA 7: COMPORTAMIENTO TEMPORAL DE LA INESTABILIDAD EN LOS NODOS



VII. CONCLUSIONES.

El método explícito basado en la aproximación de la derivada temporal mediante diferencia progresiva y la derivada espacial mediante diferencia de punto central, es fácil de implementar, pero requiere de un conocimiento suficiente de la dinámica del sistema a simular para evitar llevar el algoritmo a la inestabilidad por un muestreo o paso de simulación inadecuado.

El modelado mediante ecuaciones diferenciales parciales parabólicas permite estudiar el fenómeno en su evolución temporal y espacial.

La dinámica del sistema determinada por las características de difusión térmica del material, conjuntamente con la razón de paso temporal espacial configura la base para el análisis de convergencia y estabilidad del algoritmo.

El algoritmo planteado en este artículo se comporta aceptablemente al compararlo con los resultados del artículo base (Millán *et al.*, 2011).

Para el caso de estudio la convergencia del algoritmo varía con la ventana temporal.
Para el caso de estudio la estabilidad del algoritmo no es sensible a la variación de la ventana temporal.

Durante el refinamiento de los pasos temporal y espacial la estabilidad el algoritmo mostró mayor sensibilidad cuando variamos el paso espacial, aunque durante la variación del paso temporal también se presenta la inestabilidad pero con menor sensibilidad.

VIII. REFERENCIAS BIBLIOGRAFICAS

Millán, Zulma, et al. 2011. Simulación numérica. Ecuación de difusión. Revista Iberoamericana de Ingeniería Mecánica 15.2 : 29-38.

Romero, S., et al. 2001. Introducción a las Ecuaciones en Derivadas Parciales (EDP's), Huelva, Servicio de Publicaciones. Universidad de Huelva, 195. http://www.uhu.es/sixto.romero/EDP_libro.pdf 19-07-2013

Ezquerro, J. 2012. Iniciación a los métodos numéricos. Servicio de publicaciones. Universidad de La Rioja, 149. http://dialnet.unirioja.es/descarga/libro/489813.pdf 19-07-2013